

## 三例具有大的倍频效应的无机硼/碳/硝酸盐非线性光学晶体的设计组装和性能调控

### 一、项目简介

非线性光学晶体是全固态激光器的基本材料之一，广泛应用于激光技术、光学通讯、光学数据存储和光信号处理等方面。如何获得新型具有大的非线性光学系数、合适的双折射率、以及优良的物理化学性能和良好生长习性的非线性光学晶体一直是晶态材料研究领域的一个重大挑战。本项目尝试以 $[\text{BO}_3]^{3-}$ 、 $[\text{NO}_3]^-$ 和 $[\text{CO}_3]^{2-}$ 基团为主，引入易发生二阶姜-泰勒畸变含  $6s^2$  孤对电子的金属离子  $\text{Pb}^{2+}$ 、辅以紫外范围没有吸收的碱金属及碱土金属，利用孤对电子之间或孤对电子和平面  $\pi$  共轭的基团的协同作用，结合性能测试和相关理论计算，从中筛选出三种具有大的非线性光学系数以及优良的物理化学性能的新型硼/碳/硝酸盐二阶非线性光学晶体材料。具体工作如下：

(1) 在水热条件下生长出四羟基硼酸钡晶体  $\text{Ba}_2[\text{B}_6\text{O}_9(\text{OH})_4]$ 。该晶体是一种潜在的可应用于深紫外的非线性光学材料。

(2) 通过水热法合成了第一例具有大的倍频效应的硝酸盐非线性光学晶体：碱式硝酸铅  $\text{Pb}_{16}(\text{OH})_{16}(\text{NO}_3)_{16}$ 。该化合物为单斜晶系，非中心称的  $Cc$  空间群。该化合物的带隙为  $3.8\text{eV}$ ，粉末倍频效应约为 KDP 的 3.5 倍，且能够实现 I-型相位匹配。

(3) 通过水热成功合成出了同时含有硼酸和碳酸的硼碳酸盐非线性光学晶体材料  $\text{Pb}_7\text{O}(\text{OH})_3(\text{CO}_3)_3(\text{BO}_3)$ 。该化合物属于六方晶系， $P63mc$  空间群。粉末倍频效应约为 KDP 的 4.5 倍，且能够实现 I-型相位匹配。

### 二、提名单位（专家）意见

符合自治区自然科学奖提名要求，同意推荐。

### 三、代表性论文、专著目录

序号	论文专著名称	刊名	年卷期	影响因子	发表时间	第一作者
1	UV Nonlinear Optical Crystal Ba <sub>2</sub> [B <sub>6</sub> O <sub>9</sub> (OH) <sub>4</sub> ] Featuring Unique Chiral Layers with a New B <sub>18</sub> O <sub>42</sub> Circle Based on BO <sub>3</sub> and BO <sub>4</sub> Units	Inorganic Chemistry	2012, 51, 1852-1858	4.857	2012/1/19	Li Wang
2	A Nitrate Nonlinear Optical Crystal Pb <sub>16</sub> (OH) <sub>16</sub> (NO <sub>3</sub> ) <sub>16</sub> with a Large Second-Harmonic Generation Response	Inorganic Chemistry	2014, 53, 3320-3325	4.857	2014/3/11	Lixian Chang
3	Pb <sub>7</sub> O(OH) <sub>3</sub> (CO <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> (BO <sub>3</sub> ): First Mixed Borate and Carbonate Nonlinear Optical Material Exhibiting Large Second-Harmonic Generation Response	Inorganic Chemistry	2015, 54, 4138-4142	4.857	2015/3/31	Maier haba Abud oureh eman
4	Synthesis, structure, and electronic structure calculation of a new centrosymmetric borate Pb <sub>2</sub> O[B <sub>2</sub> O(OH)] based on anion-centered OPb <sub>4</sub> tetrahedra	Journal of Solid State Chemistry	2016, 240, 61-66	2.291	2016/5/14	Feng Sun
5	Synthesis, structure and electronic calculation of alkali metals borate Li <sub>2</sub> Na[B <sub>5</sub> O <sub>8</sub> (OH) <sub>2</sub> ]	Inorganic Chemistry Communications	2017, 79, 104-108	1.795	2017/3/29	Qian Wang
6	A new alkaline-earth metal borate SrB <sub>3</sub> O <sub>4</sub> (OH) <sub>3</sub> •H <sub>2</sub> O with UV cutoff edge below 190 nm	Inorganic Chemistry Communications	2018, 92, 35-39	1.795	2018/4/5	Hong-Jun Zhou
7	Synthesis, structure and electronic structure calculation of a new perovskite type phosphate fluoride K <sub>2</sub> BaPO <sub>4</sub> F	Inorganic Chemistry Communications	2018, 93, 110-114	1.795	2018/5/19	Mei-Si Zhang

#### 四、主要完成人情况

##### 1. 王莉

排名：第一

技术职务：教授

行政职务：无

工作单位：新疆师范大学化学化工学院

对本项目技术创新贡献：作为项目主持人，负责组织协调整个项目的进行。项目组由王莉教授负责项目的总体规划，和课题组的成员一起进行材料的合成及性能测试，课题组进行数据的总体讨论。

##### 2. 常立县

排名：2

技术职务：无

行政职务：无

工作单位：无（在读博士）

对本项目技术创新贡献：在负责人的指导下，负责紫外非线性光学晶体  $Ba_2[B_6O_9(OH)_4]$  和硝酸盐型非线性光学晶体  $Pb_{16}(OH)_{16}(NO_3)_{16}$  的合成，部分性能测试、数据讨论等。

##### 3. 买尔哈巴·阿不都热合曼

排名：3

技术职务：无

行政职务：无

工作单位：新疆大学

对本项目技术创新贡献：在负责人的指导下，负责硼酸根和碳酸根混合型非线性光学晶体  $Pb_{70}(OH)_3(CO_3)_3(BO_3)$  的合成，部分性能测试、数据讨论等。

#### 五、完成人合作关系说明

完成人合作关系情况汇总表				
序号	合作方式	合作者	合作时间	合作成果
1	论文合著	<b>Li Wang, Shilie Pan,* Lixian Chang, Jianyang Hu, and Hongwei Yu</b>	2010.1-2013.1	代表性论文 1: <i>Inorg. Chem.</i> 2012, 51, 1852-1858
2	论文合著	<b>Lixian Chang, Li Wang,* Xin Su, Shilie Pan,* Reshalaiti Hailili, Hongwei Yu, and Zihua Yang</b>	2010.1-2013.1	代表性论文 2: <i>Inorg. Chem.</i> 2014, 53, 3320-3325
3	论文合著	<b>Maierhaba Abudourehman, Li Wang,* Xianming Zhang, Hongwei Yu, Zihua Yang, Chen Lei, Jian Han, and Shilie Pan*</b>	2012.9-2015.7	代表性论文 3: <i>Inorg. Chem.</i> 2015, 54, 4138-4142

## 六、知情同意书

论文使用均已取得相关人员的同意，其余未列出的作者均已签署“不作为候选人报奖知情同意书”。